

# MATEMÁTICA COMPUTACIONAL

## Cap. 7. Aproximação Mínimos Quadrados

**Filipe J. Romeiras**

Departamento de Matemática  
Instituto Superior Técnico

Novembro de 2007

Apontamentos das aulas da disciplina do mesmo nome do 2<sup>o</sup> ano do  
Mestrado Integrado em Engenharia Física Tecnológica



## 7. APROXIMAÇÃO MÍNIMOS QUADRADOS

### Introdução

• É muitas vezes de interesse o problema de aproximar uma função “complicada” por uma função “simples”. Já anteriormente considerámos exemplos de funções que podem ser usadas como funções aproximadoras: (1) os polinómios de Taylor; (2) os polinómios interpoladores.

Neste capítulo consideraremos outros tipos de funções aproximadoras para  $f$ , sem a exigência que elas interpoem  $f$ . Com efeito, em muitas situações não é conveniente que a função aproximadora seja uma função interpoladora. Por exemplo, suponhamos que a função  $f$  traduz uma relação entre duas grandezas físicas,  $x$  e  $f(x)$ . Suponhamos ainda que os valores  $f(x_i)$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ , foram obtidos experimentalmente; ou seja, apenas dispomos de valores  $f(x_i) + \varepsilon_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ , onde os erros  $\varepsilon_i$  são desconhecidos. Neste caso, não seria razoável aproximar  $f$  por um polinómio passando por  $(x_i, f(x_i) + \varepsilon_i)$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ , a não ser que os erros  $\varepsilon_i$  fossem pequenos. Uma solução mais adequada seria utilizar um polinómio obtido pelo chamado **método dos mínimos quadrados**, onde se reduz o efeito dos erros dos dados.

• Para se avaliar a qualidade de uma aproximação precisamos de introduzir uma noção de distância entre a função e a função aproximadora.

**Definição.** Seja  $E$  um conjunto não vazio. Uma função  $d : E \times E \rightarrow \mathbb{R}$  que verifica as condições

$$(M1) \quad d(f, g) \geq 0 \text{ e } d(f, g) = 0 \Leftrightarrow f = g, \quad \forall f, g \in E;$$

$$(M2) \quad d(f, g) = d(g, f), \quad \forall f, g \in E;$$

$$(M3) \quad d(f, g) \leq d(f, h) + d(h, g), \quad \forall f, g, h \in E;$$

diz-se uma **métrica** ou **distância**. O conjunto  $E$  onde está definida a métrica diz-se um **espaço métrico**.

**Problema geral da aproximação.** Seja  $E$  um espaço métrico e  $F \subset E$  um subespaço de  $E$ . Dado um elemento  $f \in E$  pretende saber-se se existe um elemento  $\phi^* \in F$  tal que

$$d(f, \phi^*) = \inf_{\phi \in F} d(f, \phi).$$

Se existir então  $\phi^*$  é chamada uma **melhor aproximação (m.a.)** de  $f$  em  $F$  relativamente à métrica ou distância  $d$ . Se existir interessa saber se é único, quais as suas propriedades e como pode ser construído.

• Dado  $f \in E$ , o problema de determinar a m.a.  $\phi^*$  de  $f$  em  $F \subset E$  é em geral difícil. Vamos apenas considerar o importante caso em que  $E$  é um espaço pré-Hilbertiano, isto é, um espaço vectorial munido de um produto interno. Veremos que a determinação da m.a. relativamente à distância induzida pela norma induzida pelo produto interno pode ser reduzida à resolução de um sistema de equações lineares.

## Melhor aproximação em espaços pré-Hilbertianos

**Definição.** Seja  $E$  um espaço vectorial. Uma função  $\langle \cdot, \cdot \rangle : E \times E \rightarrow \mathbb{R}$ , que verifica as condições

$$(P1) \quad \langle f, f \rangle \geq 0 \text{ e } \langle f, f \rangle = 0 \Leftrightarrow f = 0, \quad \forall f \in E;$$

$$(P2) \quad \langle f, g \rangle = \langle g, f \rangle, \quad \forall f, g \in E;$$

$$(P3) \quad \langle f, \alpha g + \beta h \rangle = \alpha \langle f, g \rangle + \beta \langle f, h \rangle, \quad \forall f, g, h \in E, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R};$$

diz-se um **produto interno**. O espaço  $E$  onde está definido um produto interno diz-se um **espaço pré-Hilbertiano (p-H)**.

- Um produto interno induz a norma

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle},$$

passando  $E$  a ser um espaço normado. Uma norma induz uma distância

$$d(f, g) = \|f - g\|,$$

passando  $E$  a ser um espaço métrico.

**Exemplo.**  $E = \mathbb{R}^d$  dotado do produto interno

$$\langle f, g \rangle = \sum_{i=1}^d w_i f_i g_i, \quad \forall f, g \in E,$$

onde  $f = (f_1, f_2, \dots, f_d)$ ,  $g = (g_1, g_2, \dots, g_d)$  e  $w_1, w_2, \dots, w_d$  são constantes positivas, é um espaço p-H.

**Exemplo.**  $E = C([a, b])$  dotado do produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b w(x) f(x) g(x) dx, \quad \forall f, g \in C([a, b]), \quad (*)$$

onde  $w$  é uma função de peso, é um espaço p-H.

**Definição.** Uma função  $w : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  é uma **função de peso** se verificar as seguintes condições:

$$(i) \quad w(x) \geq 0, \quad \forall x \in [a, b];$$

$$(ii) \quad \{x \in [a, b] : w(x) = 0\} \text{ é finito};$$

$$(iii) \quad \int_a^b x^n w(x) dx \text{ existe e é finito para qualquer } n \in \mathbb{N}_0.$$

**Exemplos.**

- (i)  $w(x) = 1, \quad x \in [a, b];$
- (ii)  $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \quad x \in ]-1, 1[;$
- (iii)  $w(x) = e^{-x}, \quad x \in [0, \infty[;$
- (iv)  $w(x) = e^{-x^2}, \quad x \in ]-\infty, +\infty[.$

**Problema I.** Sejam  $E = C([a, b])$  e  $F$  um subespaço de  $E$  de dimensão finita. Dada  $f \in E$  determinar  $\phi^* \in F$  que minimiza o integral

$$\int_a^b w(x)[f(x) - \phi(x)]^2 dx.$$

Chama-se a  $\phi^*$  a **melhor aproximação mínimos quadrados (m.a.m.q.)** de  $f$  em  $F$ .

**Nota.** Em termos do produto interno (\*) em  $C([a, b])$  o problema toma a forma: dada  $f \in E$  determinar  $\phi^* \in F$  tal que

$$\|f - \phi^*\| = \min_{\phi \in F} \|f - \phi\|.$$

**Problema II.** Sejam  $E = C([a, b])$ ,  $F$  um subespaço de  $E$  de dimensão finita  $n + 1$  e  $\Pi = \{x_0, x_1, \dots, x_N\}$  um conjunto de  $N + 1$  pontos distintos de  $[a, b]$ , verificando-se que  $N \geq n$ . Dada  $f \in E$  determinar  $\phi^* \in F$  que minimiza a soma

$$\sum_{i=0}^N w_i [f(x_i) - \phi(x_i)]^2.$$

Chama-se a  $\phi^*$  a **melhor aproximação mínimos quadrados discreta (m.a.m.q.d.)** de  $f$  em  $F$ .

**Nota.** Em termos do produto interno em  $\mathbb{R}^d$  acima definido o problema toma a seguinte forma. Começa-se por associar a cada  $f \in E$  um vector  $\bar{f} \in \mathbb{R}^{N+1}$  tal que  $\bar{f}_i = f(x_i), i \in \{0, 1, \dots, N\}$ . Seja ainda  $\bar{F} = \{\bar{\phi} \in \mathbb{R}^{N+1} : \phi \in F\} \subset \mathbb{R}^{N+1}$ . Dada  $f \in E$  determinar  $\bar{\phi}^* \in \bar{F}$  tal que

$$\|\bar{f} - \bar{\phi}^*\| = \min_{\bar{\phi} \in \bar{F}} \|\bar{f} - \bar{\phi}\|.$$

**Proposição (Caracterização da m.a. num espaço p-H).** Sejam  $E$  um espaço p-H e  $F$  um subespaço de  $E$ . Dado  $f \in E$ , o elemento  $\phi^* \in F$  é uma m.a. de  $f$  em  $F$  se e só se

$$\langle f - \phi^*, \phi \rangle = 0, \quad \forall \phi \in F.$$

A m.a. de  $f$  em  $F$  é única.

Dem.: ( $\dots$ )

**Proposição (Sistema normal).** Sejam  $E$  um espaço p-H,  $F$  um subespaço de  $E$  de dimensão finita  $n + 1$  e  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$  uma base de  $F$ . Então a m.a.  $\phi^*$  de  $f \in E$  em  $F$  é dada por

$$\phi^* = \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k,$$

onde  $a_0^*, \dots, a_n^*$  é a solução única do **sistema normal**

$$\sum_{k=0}^n \langle \varphi_j, \varphi_k \rangle a_k^* = \langle f, \varphi_j \rangle, \quad j = 0, 1, \dots, n,$$

ou

$$\begin{bmatrix} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_0, \varphi_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_n, \varphi_0 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f, \varphi_0 \rangle \\ \vdots \\ \langle f, \varphi_n \rangle \end{bmatrix}.$$

**Exemplo.** Determinar a m.a.m.q. de  $f \in E = C([0, 1])$  no subespaço  $F$  gerado pela base  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$ ,  $\varphi_j(x) = x^j$ , no caso em que  $w(x) = 1, \forall x \in [0, 1]$ . Note-se que a matriz do sistema normal é a matriz de Hilbert de ordem  $n + 1$ .

**Exemplo.** Determinar a m.a.m.q.d. de  $f \in E = C([a, b])$  no subespaço  $F$  gerado pela base  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$ , no caso em que  $w_i = 1, \forall i \in \{0, 1, \dots, n\}$ . Particularizar para o caso em que  $\varphi_j(x) = x^j$ .

### Sistemas ortogonais.

**Definição.** Um conjunto  $S$  de elementos de um espaço p-H  $E$  diz-se **ortogonal** se

$$\langle u, v \rangle = 0, \quad \forall u, v \in S, \quad u \neq v,$$

(e usa-se a notação  $u \perp v$ ). Se, além disso,

$$\langle u, u \rangle = 1, \quad \forall u \in S,$$

o sistema diz-se **ortonormado**.

**Proposição (Teorema de Pitágoras).** Sendo  $\{u_0, u_1, \dots, u_n\}$  um conjunto ortogonal então

$$\left\| \sum_{i=0}^n u_i \right\|^2 = \sum_{i=0}^n \|u_i\|^2.$$

Dem.: ( $\dots$ )

**Proposição.** Um conjunto finito ortogonal de elementos não nulos é um conjunto de elementos linearmente independentes.

Dem.: ( $\dots$ )

**Proposição (Ortogonalização de Gram-Schmidt).** Seja  $\{e_0, \dots, e_n\}$  uma base de um subespaço  $F$  de um espaço p-H  $E$ . Seja  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$  o conjunto de elementos definidos por

$$\varphi_j = e_j - \sum_{k=0}^{j-1} \frac{\langle e_j, \varphi_k \rangle}{\langle \varphi_k, \varphi_k \rangle} \varphi_k,$$

e seja  $\{\hat{\varphi}_0, \dots, \hat{\varphi}_n\}$  o conjunto de elementos definidos por

$$\hat{\varphi}_j = \frac{\varphi_j}{\|\varphi_j\|}.$$

Então o conjunto  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$  constitui uma base ortogonal para  $F$  enquanto que o conjunto  $\{\hat{\varphi}_0, \dots, \hat{\varphi}_n\}$  constitui uma base ortonormada para  $F$ .

**Exemplo.** Determinar o sistema de polinômios ortogonais no intervalo  $[-1, 1]$  em relação ao produto interno definido por (\*) com  $w(x) = 1, \forall x \in [-1, 1]$ .

**Proposição (M.a. num espaço p-H usando uma base ortogonal (ortonormada)).** Sendo  $E$  um espaço p-H,  $F$  um subespaço de  $E$  de dimensão finita e  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$  uma base ortogonal de  $F$ , então a m.a.  $\phi^*$  de  $f \in E$  em  $F$  é dada por

$$\phi^* = \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k, \quad a_k^* = \frac{\langle f, \varphi_k \rangle}{\langle \varphi_k, \varphi_k \rangle}.$$

Se a base for ortonormada ter-se-á simplesmente

$$\phi^* = \sum_{k=0}^n a_k^* \varphi_k, \quad a_k^* = \langle f, \varphi_k \rangle.$$

Dem.: ( $\dots$ )

### Polinômios ortogonais.

• Consideremos o espaço  $C([a, b])$  com o produto interno definido por (\*). O processo de orthogonalização de Gram-Schmidt aplicado ao conjunto  $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$  permite obter diferentes bases ortogonais para  $\mathcal{P}_n$ , o conjunto de polinômios de grau menor ou igual a  $n$ , correspondentes a diferentes funções de peso  $w$ . Uma maneira alternativa de construir polinômios ortogonais é usar o teorema seguinte.

**Proposição (Relação de recorrência tripla).** O conjunto de polinômios  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$ , definidos por

$$\begin{aligned} \varphi_0(x) &= 1, & \varphi_1(x) &= x - B_1, \\ \varphi_k(x) &= (x - B_k)\varphi_{k-1}(x) - C_k\varphi_{k-2}(x), & k &\geq 2, \end{aligned}$$

com

$$B_k = \frac{\langle x\varphi_{k-1}, \varphi_{k-1} \rangle}{\langle \varphi_{k-1}, \varphi_{k-1} \rangle}, \quad k \geq 1, \quad C_k = \frac{\langle x\varphi_{k-1}, \varphi_{k-2} \rangle}{\langle \varphi_{k-2}, \varphi_{k-2} \rangle}, \quad k \geq 2,$$

é ortogonal em relação ao produto interno definido por (\*), isto é,

$$\langle \varphi_j, \varphi_k \rangle = \int_a^b w(x)\varphi_j(x)\varphi_k(x) dx = 0, \quad j \neq k.$$

**Nota.** Esta via produz polinómios ortogonais **mónicos**, isto é, com coeficiente unitário da potência mais elevada.

**Exemplo.** Determinar o sistema de polinómios ortogonais no intervalo  $[-1, 1]$  em relação ao produto interno definido por (\*) com  $w(x) = 1, \forall x \in [-1, 1]$ .

**Proposição.** Seja  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$  um sistema de polinómios ortogonais em relação ao produto interno definido por (\*). Admite-se implicitamente que  $\text{grau}(\varphi_j) = j$ . Se  $p$  é um polinómio de grau  $m < n$  então:

$$(1) \langle p, \varphi_j \rangle = 0, \quad j = m + 1, \dots, n; \quad (2) p = \sum_{j=0}^m \frac{\langle p, \varphi_j \rangle}{\langle \varphi_j, \varphi_j \rangle} \varphi_j.$$

**Proposição.** Seja  $\{\varphi_0, \dots, \varphi_n\}$  um sistema de polinómios ortogonais em relação ao produto interno definido por (\*). Admite-se implicitamente que  $\text{grau}(\varphi_j) = j$ . Então o polinómio  $\varphi_j$  tem exactamente  $j$  raízes reais distintas no intervalo aberto  $]a, b[$ .

**Exemplo.** Polinómios de Legendre,  $P_n$  ( $x \in [a, b] = [-1, 1], w(x) = 1$ ):

$$\begin{cases} P_n(x) = \frac{2n-1}{n} x P_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x), & n \geq 2 \\ P_0(x) = 1, & P_1(x) = x \end{cases}$$

$$\text{grau}(P_n) = n, \quad P_n(1) = 1, \quad n \geq 0$$

$$\langle P_n, P_m \rangle = \begin{cases} 0, & n \neq m, \\ \frac{2}{2n+1}, & n \geq 0. \end{cases}$$

$$A_n = \lim_{x \rightarrow \infty} x^{-n} P_n(x) = \frac{(2n)!}{2^n (n!)^2}, \quad n \geq 1$$

**Exemplo.** Polinómios de Chebyshev,  $T_n$  ( $x \in [a, b] = [-1, 1], w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ ):

$$\begin{cases} T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x), & n \geq 2 \\ T_0(x) = 1, & T_1(x) = x \end{cases}$$



$$\text{grad}(T_n) = n, \quad T_n(1) = 1, \quad n \geq 0$$

$$\langle T_n, T_m \rangle = \begin{cases} 0, & n \neq m, \\ \pi, & n = m = 0, \\ \frac{\pi}{2}, & n = m > 0 \end{cases}$$

$$A_n = \lim_{x \rightarrow \infty} x^{-n} T_n(x) = 2^{n-1}, \quad n \geq 1$$

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), \quad n \geq 0$$

$$T_n(x_i) = 0, \quad x_i = -\cos \frac{(2i+1)\pi}{2n}, \quad i = 0, \dots, n-1, \quad n \geq 1$$